



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE  
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2019/2020

Nº de proyecto 101

**Página web orientada a la evaluación “*in silico*” de  
nuevas sustancias con interés biológico**

Responsable del Proyecto;

Eva Ramos Alonso

Facultad de Veterinaria

Departamento de Farmacología y Toxicología

## 1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

Dada la buena acogida que ha tenido el proyecto en anteriores ediciones no propusimos mejorarlo añadiendo nuevas mejoras y hacer pruebas piloto con los estudiantes. Nuestro objetivo fue proporcionar a los alumnos, tanto de Grado como de Master, un entorno multilingüe de aprendizaje virtual adaptativo donde poner en práctica los conocimientos de toxicología adquiridos en las clases teóricas complementando e incrementando así el conocimiento aplicado. Y que los alumnos de diversas nacionalidades puedan adquirir experiencia práctica en el manejo de datos toxicológicos y herramientas virtuales que cada día están más presentes en la vida profesional, llevando a cabo procedimientos experimentales predictivos y evaluaciones toxicológicas “*in silico*” con herramientas reales.

Mejorar y ampliar la página web “INSILITOX” ofreciendo un entorno internacional y más completo, englobando nuevos enlaces a herramientas validadas para realizar análisis toxicológicos on-line. Para ello la experiencia de los profesores que participan en el proyecto trabajando con estas herramientas online es fundamental para el desarrollo del proyecto. Y de esta manera, responder a la necesidad de un entorno que englobe las numerosas herramientas a las que se puede acceder y que además adquiera un valor añadido con tutoriales o textos explicativos para su comprensión y utilización.

Tratamos que cualquier alumno ya sea nacional o internacional pueda aprender, no solo a cómo usar e interpretar los datos, sino también a la aplicación potencial de dichos datos obtenidos a través de los sistemas *in silico*.

Como referencia se pretende valorar el método a través de encuestas a los alumnos comparándolo con el método tradicional.

## 2. Objetivos alcanzados

Los objetivos planteados ha sido alcanzados. Se ha rediseñado el entorno web donde se engloban enlaces de herramientas validadas para realizar análisis toxicológicos *on-line*. “<https://www.velixea.com/en/insilitox/>” (anexo)

La web “INSILITOX” se ha reestructurado como una interfaz multilingüe donde se encuentran recopilados los enlaces a las mencionadas herramientas, y además cuenta con textos e imágenes donde se explica en ambos idiomas, detalladamente en qué consisten estas herramientas determinando así su utilidad.

Todas las herramientas a las que se hace referencia son de reconocido prestigio en el ámbito científico, conjuntamente suponen la creación de un entorno que facilita el acceso directo a las principales herramientas a las que se puede acceder gratuitamente y que además consta de un valor añadido con tutoriales y textos explicativos para su comprensión y utilización.

La experiencia de los miembros que participan en el proyecto trabajando con estas herramientas *on-line* ha sido fundamental para el desarrollo del proyecto. Ha facilitado que los alumnos puedan manejar datos toxicológicos, con aplicación tanto real como potencial a través de los sistemas *in silico*.

Las encuestas realizadas a los alumnos han demostrado que este método es atractivo y efectivo en comparación con el método tradicional.

Además, hemos tenido la oportunidad de participar en foros internacionales de educación superior donde se ha divulgado la experiencia.

Los objetivos planteados al inicio del proyecto han sido alcanzados y nos sirven como punto de partida para seguir evolucionando la web ofreciendo un entorno cada vez más amplio y completo. Lo que repercute directamente en el aprendizaje de los alumnos.

### **3. Metodología empleada en el proyecto**

Se han realizado reuniones de los miembros del equipo para la puesta en común de las herramientas más importantes a incluir en la web y para definir el grado de implicación específico de cada miembro del proyecto.

Se ha rediseñado una página web intuitiva y multilingüe, donde se recopilan las más importantes herramientas, validadas por las principales autoridades reguladoras como la OCDE, ECVAM, EPA ...

Se han elaborado en varios idiomas una serie de tutoriales de contenido específico para facilitar la comprensión de las distintas evaluaciones que se abordan en la web.

Finalmente, el resultado se ha divulgado en el Congreso de Educación Internacional INTED 2020 (14th International Technology, Education and Development Conference). *"Acquirement of theoretical knowledge with practical toxicology."* ISBN: 978-84-09-17939-8.

### **4. Recursos humanos**

El grupo está formado por un equipo de trabajo interdisciplinar consolidado en el ámbito de la toxicología, las evaluaciones *in silico* y la creación de entornos web.

La totalidad del equipo ha sido esencial en el desarrollo del proyecto conforme al plan de trabajo presentado.

Los miembros del equipo poseen numerosas evaluaciones positivas y excelentes del Programa Docencia de la UCM, proyectos de innovación docente, publicaciones y contribuciones docentes lo cual demuestra la relevante trayectoria en innovación docente del grupo.

### **5. Desarrollo de las actividades**

En las primeras reuniones mantenidas entre los miembros del equipo para la puesta en común de aquellas herramientas que tenían mayor relevancia e interés para los estudiantes e investigadores se definieron las que consideramos más importantes para la evaluación de la toxicidad de nuevas sustancias de interés biológico a incluir en la web. En esta reunión también se definieron las actividades específicas de cada miembro del proyecto.

Posteriormente se ha procedido a elaborar una página web intuitiva, donde hemos recopilado las más importantes herramientas, que además cuentan con el respaldo y la validación de las principales autoridades reguladoras como la OCDE, ECVAM, EPA ...

Dentro de cada una de ellas hemos incluido una serie de tutoriales de contenido específico para facilitar la comprensión de las distintas evaluaciones que se abordan en las distintas herramientas recopiladas.

Tras su implementación con los alumnos se ha procedido a realizar cuestionarios de evaluación para validar la efectividad de la prueba piloto

Finalmente, los resultados se han divulgado en foros y congresos de educación internacionales como INTED.

## 6. Anexo (capturas de la página web)

En este apartado se incluyen capturas de pantalla extraídas de la página web.



VELIXea

home our services work with us contact us vlx connect Insilitox   

**Bienvenidos a INSILITOX**

Web orientada a la toxicología IN SILICO



**INSILITOX - ON LINE ANALYSIS**

**COSMOS**  
Cosmetics Safety

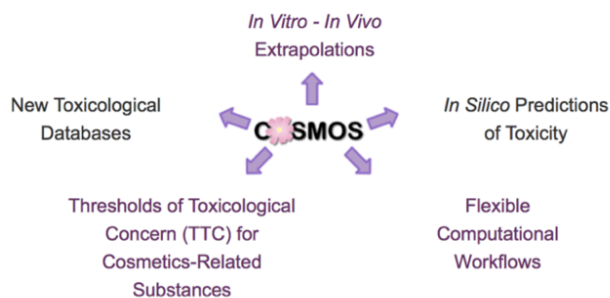
**ToxBank**  
Compound Testing

**in silico toxicology gmbh**  
Structure-Activity Relationship

  
Chemical Screening



The main aim of COSMOS was to develop freely available tools and workflows to predict the safety to humans following the use of cosmetic ingredients.

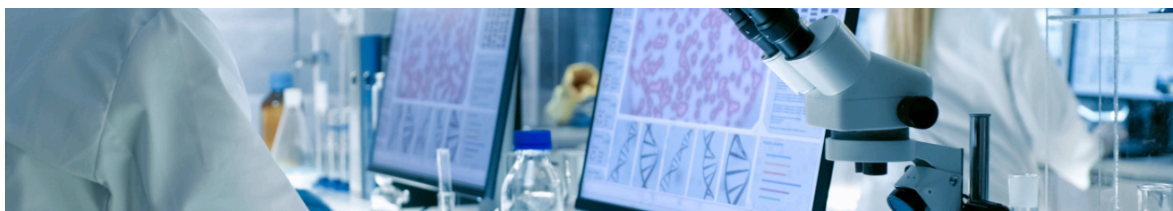


- ToxBank provides a dedicated data warehouse for toxicity data management and modelling, a «gold standards» compound database and repository of selected test compounds, and a reference resource for cells, cell lines and tissues of relevance for in vitro systemic toxicity research.
- ToxBank supports the data management and analysis activities carried out across the Alternative Testing Strategies

Data Warehouse

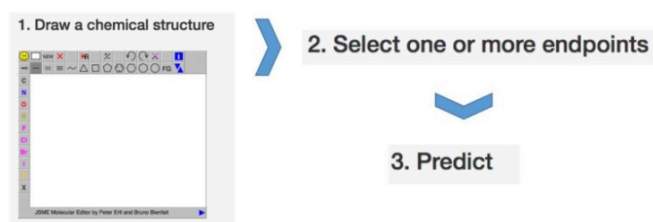
Requires registration

BIO & COMPOUND WIKI



## in silico toxicology

*Lazy Structure-Activity Relationships* takes a chemical structure as input and provides predictions for a variety of toxic properties. *lazar* uses an automated and reproducible *read across* procedure to calculate predictions. Rationales for predictions, applicability domain estimations and validation results are presented in a clear graphical interface for the critical examination by toxicological experts. *lazar* is built on top of the OpenTox framework.



### (DSSTox) Database

DSSTox provides a high quality public chemistry resource for supporting improved predictive toxicology. A distinguishing feature of this effort is the accurate mapping of bioassay and physicochemical property data associated with chemical substances to their corresponding chemical structures.

The iCSS ToxCast Dashboard is an interactive tool for distribution, visualization, and use of chemical screening data from the Toxicity Forecaster (ToxCast) project and the Toxicity Testing in the 21st century (Tox21) collaboration.

The screenshot shows the EPA iCSS ToxCast Dashboard. It includes a search bar, filters for Chemicals and Assays, and a table of results. The table lists chemical names, CASRN, and assay results. On the right, there is a section for Chemical Structure and Data, showing a chemical structure and various identifiers like DSSTOX GRID, CASRN, and SMILES.